Index

Commentationes et Relationes

AGENO, M.: An Alternative Model for Anomalous Water . . . 334
AHLRICHS, R.: *Ab initio* Calculations on Small Hydrides Including Electron Correlation. IV. A Study of the Molecules BeH_2, Be_2H_4 and Be_3H_6 . . . 348
— s. JUNGEN, M. . . . 339
AKE, R. L., GOUTERMAN, M.: Porphyrins. XX. Theory for the States of Ni(d^8) Complexes . . . 408
ANDREEV, E. A., NIKITIN, E. E.: Nichtadiabatische Übergänge bei Stößen zwischen Atomen und Molekülen. Desaktivierung von Br($4^2P_{1/2}$)- und J($5^2P_{1/2}$)-Atomen durch zweiatomige Moleküle (N_2, CO) . . . 171

BADER, R. F. W., PRESTON, H. J. T.: Determination of the Charge Distribution of Methane by a Method of Density Constraints . . . 384
BAIRD, N. C., LEMAIRE, D.: Nonempirical SCF-LCAO-MO Calculations for $(CH)^+$ . . . 158
BENDAZZOLI, G. L., BERNARDI, F., PALMIERI, P.: Excited Orbitals of Sulphur in Aliphatic and Unsaturated Sulphides . . . 61
BERNARDI, F., s. BENDAZZOLI, G. L., et al. . . . 61
BERNDT, M., KWIATKOWSKI, J. S.: Electronic Structure and Spectra of Organic Molecules. Part X. SCF MO CI Calculations for the Hydroxy Derivative Anions of Some Aromatic Molecules . . . 35
BERTRAN, J., DANNENBERG, J. J., LEUTE, R., PONCE, C., CHALVET, O., DAUDEL, R.: Sur le calcul du P_K des premiers états excités singulet et triplet du β naphtol et de la β naphtylamine . . . 249
BONNET, M., s. JULG, A., et al. . . . 49
BOSSA, M., RAMUNNI, G., FRANCHINI, P. F.: On the Configuration of 2,2′-Bipyridyl and 5,5′-Bis-Isoxazole by Means of the CNDO/2 Method . . . 327
BRILL, T. B., s. SCHREINER, A. F. . . . 323
BROWN, R. D., JAMES, B. H., O'DWYER, M. F.: Molecular Orbital Calculations on Transition Element Compounds. I. Method . . . 264
— — — Molecular Orbital Calculations on Transition Element Compounds. III. MCZDO Studies of Permanganate and Chromate . . . 362
— — MCQUADE, T. J. V., O'DWYER, M. F.: Molecular Orbital Calculations on Transition Element Compounds. II. CNDO Type Studies of Permanganate and Chromate . 279
DE BRUIJN, S.: Theoretical and Practical Aspects of the ZDO Approximation . . . 293
BUTLER, J. B., s. LIELMEZS, J., et al. . . . 81

CAILLET, J., PULLMAN, B.: Quantum-Mechanical Studies on the Conformational and Electronic Properties of Steroids. I. The Sterane (Perhydrocyclopentanophenanthrene) Ring System and its Constituent Subunits . . . 377
CARBO, R.: The Perturbation Theory for Non-Degenerate States and the Extended Hückel Method . . . 74
CARLES, P., s. JULG, A. . . . 301
ČÁRSKY, P., ZAHRADNÍK, R.: Conjugated Radicals. VI. Semiempirical Open-Shell PPP -Like Calculation with Doubly Excited Configurations on the Naphthalene Radical Anion . . . 316
CHALVET, O., s. BERTRAN, J., et al. . . . 249
CHANG, T. C., GREIN, F.: Correlated One-Center Wavefunctions for Two-Electron Molecules. IV. Integrals for a Cutoff Correlation Factor. Application to H_3^+ . . . 371
CHIANG, J. F., WHITMAN, D. R.: MO-SCF Calculations for B_2O_3 . . . 155
CHOJNACKI, H.: On the Electrical Conductivity of Hydrogen Bonded Biological Systems 244
CHONG, D. P., s. GAGNON, P. J. . . . 259
COOK, D. B., s. HINCHLIFFE, A. . . . 91

DANNENBERG, J. J., s. BERTRAN, J., et al. . . . 249
DAUDEL, R., s. BERTRAN, J., et al. . . . 249
DAVID, D.-J., MELY, B.: Determination de bases de gaussiennes optimales pour les molécules . . . 145
DEWAR, M. J. S., TRINAJSTIĆ, N.: Resonance Energies of Some Compounds Containing Nitrogen or Oxygen . . . 235
DREYFUS, M., MAIGRET, B., PULLMAN, A.: A Non-Empirical Study of Hydrogen Bonding in the Dimer of Formamide . . . 109
— s. PULLMAN, A., et al. . . . 85

FRAGA, S., s. MELGAREJO, M. 69
FRANCHINI, P. F., s. BOSSA, M., et al. 327

GAGNON, P. J., CHONG, D. P.: Application of the Extended Geminal Theory to the BH Molecule 259
GIESSNER-PRETTRE, C., PULLMAN, A.: Configuration Mixing Involving σ and π Orbitals. II. The Effect of Doubly Excited Configurations on the Energy Values in the CNDO Method 120
GOUTERMAN, M., s. AKE, R. L. 408
GREIN, F., s. CHANG, T. C. 371
GUÉRIN, F.: Etats de valence $^2\Pi$ et $^2\Delta$ des molécules isoélectroniques N_2^+, CN et CO^+ . 97

HARRIS-LOEW, G.: A Comparison of Molecular Orbital and Crystal Field Calculations of Ferric Heme Compounds 18
HARTMANN, H., HIRSCHHAUSEN, H. v.: Die Gesamtelektronenfunktion des Benzolmoleküls als Einzentrenproblem in Zylinderkoordinaten 179
— PAPULA, L., STREHL, W.: Modellrechnungen an einigen Siliziumwasserstoffverbindungen vom Typ SiH_n, SiH_n und SiH_n nach der Einzentrenmethode 131
HENRY, H. C., s. LIELMEZS, J., et al. 81
HENSEN, K.: Zur Kristallstruktur des Ammonium- und Natriumfluorids 225
HINCHLIFFE, A., COOK, D. B.: N. M. R. Coupling Constants. I. The Molecular Orbital Approach 91
HIRSCHHAUSEN, H. v., s. HARTMANN, H. 179
HUNTER, G.: The Relationship between the Ritz Variational Method and Frobenius's Method of Solving Schrödinger's Equation 216

ITO, H., s. RAMSEY, B. R. 188

JAMES, B. H., s. BROWN, R. D., et al. 264
— s. BROWN, R. D., et al. 279
— s. BROWN, R. D., et al. 362
JESAITIS, R. G., STREITWIESER JR., A.: Semi-Empirical All-Valence-Electron SCF Calculations of Acidities of Cycloalkanes 165
JULG, A., BONNET, M., OZIAS, Y.: Recherches sur la structure électronique de composés soufrés (méthode L.C.A.O. améliorée). I. Thiophène, thiocétones, SO_2, SO_3 49
— CARLES, P.: Recherches sur la structure électronique et les caractéristiques des différentes formes tautomères de la purine 301
JUNGEN, M., AHLRICHS, R.: *Ab initio* Calculations on Small Hydrides Including Electron Correlation. III. A Study of the Valence Shell Intrapair and Interpair Correlation Energy of Some First Row Hydrides 339

KANG, S., s. OLSEN, J. F. 329
KWIATKOWSKI, J. S., s. BERNDT, M. 35

LABHART, H., s. NAVANGUL, H. 239
LEMAIRE, D., s. BAIRD, N. C. 158
LEUTE, R., s. BERTRAN, J., et al. 249
LEVISON, K. A., PERKINS, P. G.: Methylaluminium Compounds. I. The Electronic Structure of Some Methylaluminium and Methylboron Hydrides 1
— — Methylaluminium Compounds. II. The Electronic Structure of Trimethylaluminium 15
LIELMEZS, J., BUTLER, J. B., HENRY, H. C., ORR, R. G.: Vaporization Energy Change and Vibrational Frequency Shift in Substituted Mono-Halo-Benzenes 81

MAIGRET, B., s. DREYFUS, M., et al. 109
MCQUADE, T. J. V., s. BROWN, R. D., et al. 279
MELGAREJO, M., FRAGA, S.: Studies on the Electronic Structure of Conjugated Systems . 69
MÉLY, B., s. DAVID, D.-J. 145
— s. PULLMAN, A., et al. 85

NAVANGUL, H., LABHART, H.: Über den Beitrag der σ-Elektronen zur elektrischen Polarisierbarkeit ungesättigter Kohlenwasserstoffe 239
NIKITIN, E. E., s. ANDREEV, E. A. 171

O'Dwyer, M. F., s. Brown, R. D., et al. 264
— s. Brown, R. D., et al. 279
— s. Brown, R. D., et al. 362
Olsen, J. F., Kang, S.: Conformational Analysis and Electronic Structure of Acetanilide 329
Orr, R. G., s. Lielmezs, J., et al. 81
Ozias, Y., s. Julg, A., et al. 49

Palmieri, P., s. Bendazzoli, G. L., et al. 61
Papula, L., s. Hartmann, H., et al. 131
Perkins, P. G., s. Levison, K. A. 1
— s. Levison, K. A. 15
Ponce, C., s. Bertran, J., et al. 249
Preston, H. J. T., s. Bader, R. F. W. 384
Pullman, A., Dreyfus, M., Mély, B.: Aspects of the Electron Distribution in Adenine, Thymine and Cytosine as Given by Probability Density Curves from Nonempirical Calculations 85
— s. Dreyfus, M., et al. 109
— s. Giessner-Prettre, C. 120
Pullman, B., s. Caillet, J. 377

Ramsey, B. R., Ito, H.: Semiempirical Molecular Orbital Calculations on Boranes. I. The Relation between Transitions in Arylboronic Acids and Arylboranes 188
Ramunni, G., s. Bossa, M., et al. 327
Reinsch, E.-A.: Zur Katalyse der Cyclooctatetraen-Synthese durch Ni^{2+}-Ionen 309
Repmann, H.: Die Elektronenstruktur von Steroidhormonen. 1. Die Sexualhormone . 396
Roberts, H. G. Ff.: Uncoupled Hartree-Fock Calculations of the Ring Current Properties of some Heterocyclics 151
Roos, B., Siegbahn, P.: Polarization Functions for First and Second Row Atoms in Gaussian Type MO-SCF Calculations 199
— — Gaussian Basis Sets for the First and Second Row Atoms 209

Schreiner, A. F., Brill, T. B.: The *cis*-Effect in *trans*-$[PtCl_2XY]$ Compounds 323
Siegbahn, P., s. Roos, B. 199
— s. Roos, B. 209
Smith, D. W.: De structura electronica et stereochimica ionis $Cu(NO_2)_6^{4-}$ 89
Strehl, W., s. Hartmann, H., et al. 131
Streitwieser, Jr., A., s. Jesaitis, R. G. 165

Thomson, C.: An INDO Investigation of the Electronic Structure and Hyperfine Coupling Constants of the Radicals HBO^-, HCO and HCN^- 320
Trinajstić, N., s. Dewar, M. J. S. 235

Whitman, D. R., s. Chiang, J. F. 155

Zahradník, R., s. Čársky, P. 316

Recensiones

McGlynn, S. P., Azumi, T., Kinoshita, M.: Molecular Spectroscopy of the Triplet State (Ref. C. Sandorfy) 162
Pilar, F. L.: Elementary Quantum Chemistry. (Ref. K. Jug) 248

Erratum

Tinland, B.: A CNDO CI Study of the Electronic Structure and Spectrum of Nitrobenzene Theoret. chim. Acta (Berl.) 13, 171—174 (1969) 163

Indexed in Current Contents

Theoretica Chimica Acta

For speedy publication, this journal is issued at frequent intervals, according to the amount of material received, 5 issues normally constituting one volume. Price per volume: DM 96.—.

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries, including all rights of photocopying or reproduction by any other method.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Die Zeitschrift erscheint, um eine rasche Publikation zu ermöglichen, in einzelnen Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Ein Band besteht im allgemeinen aus 5 Heften. Der Preis eines Bandes beträgt DM 96.—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît aux courts intervalles, dans le mesure des articles reçus. En générale un volume se compose de 5 fascicules. Le prix de chaque volume est de 96 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . . , des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis pas la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 17

Index

Fasc. 5

Commentationes

JUNGEN, M., AHLRICHS, R.: *Ab initio* Calculations on Small Hydrides Including Electron Correlation. III. A Study of the Valence Shell Intrapair and Interpair Correlation Energy of Some First Row Hydrides 339

AHLRICHS, R.: *Ab initio* Calculations on Small Hydrides Including Electron Correlation. IV. A Study of the Molecules BeH_2, Be_2H_4 and Be_3H_6 348

BROWN, R. D., JAMES, B. H., O'DWYER, M. F.: Molecular Orbital Calculations on Transition Element Compounds. III. MCZDO Studies of Permanganate and Chromate 362

CHANG, T. C., GREIN, F.: Correlated One-Center Wavefunctions for Two-Electron Molecules. IV. Integrals for a Cutoff Correlation Factor. Application to H_3^+ 371

CAILLET, J., PULLMAN, B.: Quantum-Mechanical Studies on the Conformational and Electronic Properties of Steroids. I. The Sterane (Perhydrocyclopentanophenanthrene) Ring System and its Constituent Subunits 377

BADER, R. F. W., PRESTON, H. J. T.: Determination of the Charge Distribution of Methane by a Method of Density Constraints 384

REPMANN, H.: Die Elektronenstruktur von Steroidhormonen. 1. Die Sexualhormone . 396

The Electronic Structure of Steroid Hormones. 1. The Sexual Hormones

AKE, R. L., GOUTERMAN, M.: Porphyrins. XX. Theory for the States of $Ni(d^8)$ Complexes 408

Indexed in Current Contents

Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 33, Heidelberger Platz 3

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Druck: Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

Printed in Germany — Copyright © by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1970